数理解析研究所講究録
928 巻 1995 年 49-66

順序付き改良 SOR 法と直接法

早大理工　石渡恵美子 (Emiko Ishiwata)
早大理工　室谷義昭　(Yoshiaki Muroya)

特異摂動問題から得られる非対称行列を係数行列とする連立方程式 ([1],[15] 等) を実際に解く場合の非対称性を利用した有効な計算法として順序付き改良 SOR 法を提案した ([10], [11] 及び [12] 参照)。今回改良 SOR 行列のスペクトル半径 $\rho(\mathcal{L}_\Phi)=0$ とする緩和係数 ω_i の決め方と順序を考えた直接法の Gauss の消去法における UL 分解の仕方との関連性を具体的に表し、さらに三重対角行列に対する実用的な計算法とその数値実験例を示す。最後に Hessenberg 行列の場合を含むより一般の行列への応用を考え、この手法を一般化した反復解法を提案する。

1. 順序付き改良 SOR 法

$n\times n$ 行列 A に対し、適当な置換行列 P を取り、

$$\tilde{A}=PAP^T,\quad \tilde{\boldsymbol{x}}=P\boldsymbol{x},\quad \tilde{\boldsymbol{b}}=P\boldsymbol{b}$$

とおくと、順序付き改良 SOR 法は以下のように表される。

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m+1)} &= (\tilde{D}-\tilde{\Phi}\tilde{L})^{-1}\{(I-\tilde{\Phi})\tilde{D}+\tilde{\Phi}\tilde{U}\}\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)}+(\tilde{D}-\tilde{\Phi}\tilde{L})^{-1}\tilde{\Phi}\tilde{\boldsymbol{b}},\quad m=0,1,2,\cdots \qquad (1)\\ &= \tilde{\mathcal{L}}_{\tilde{\Phi}}\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)}+(\tilde{D}-\tilde{\Phi}\tilde{L})^{-1}\tilde{\Phi}\tilde{\boldsymbol{b}}\end{aligned}$$

ここで $\tilde{A}=\tilde{D}-\tilde{L}-\tilde{U}$ と分解し、$\tilde{D}$ は対角行列、$\tilde{U}$ は上三角行列、$\tilde{L}$ は狭義下三角行列であり、$\tilde{\Phi}=\mathrm{diag}(\tilde{\omega}_1,\cdots,\tilde{\omega}_n)$ は緩和係数行列である。

特に $P=I$ のとき、(1) は次のように表される。

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{(m+1)} &= (D-\Phi L)^{-1}\{(I-\Phi)D+\Phi U\}\boldsymbol{x}^{(m)}+(D-\Phi L)^{-1}\Phi\boldsymbol{b},\quad m=0,1,2,\cdots \qquad (2)\\ &= \mathcal{L}_\Phi\boldsymbol{x}^{(m)}+(D-\Phi L)^{-1}\Phi\boldsymbol{b}\end{aligned}$$

(2) 式は普通の順序の改良 SOR 法である。特に、$\omega_i=\omega,\ i=1,\cdots,n$ ならば (2) は ω についての従来の SOR 法である。また

$$P=\begin{bmatrix}0 & & 1\\ & \iddots & \\ 1 & & 0\end{bmatrix}$$

とすれば、(1) 式は逆順序の改良 SOR 法となる。

従来の SOR 法との異なる点は以下の 3 つのことを同時に考えたことである。

1) 解く順序を考慮したこと。この点は非対称行列に対して非常に重要である。

2) 緩和係数 $\tilde{\omega}_i,\ i=1,\cdots,n$ を成分毎に変えたこと。

3) $\tilde{U}$ は狭義上三角行列とは限らないこと。

最近、H.Han ら [8] と H.C.Elman ら [6] は Gauss-Seidel 法について未知数の分割と順序づけに関する研究を行っており、離散対流拡散方程式の一次元及び二次元の問題に対して自

動的な分割と順序づけの仕方を示している。K.R.James [13] は (2) 式、すなわち緩和係数を成分ごとに変えたタイプについて Gauss-Seidel と Jacobi 型の緩和係数を使って反復行列のスペクトル半径の取り得る範囲を示し、D.J.Evans と M.M.Martins [7] は Extrapolated AOR method の収束を調べた。また D.B.Russel [16]、P.H.Brazier [2]、J.C.Strikwerda [18]、L.W.Ehrlich [5] らはそれぞれ二次元の問題に対する格子点ごとの緩和係数の特別な選び方を与えている。3) については J.J.Buoni と R.S.Varga [4] が行列 $\tilde{L}$、$\tilde{U}$ は三角行列に限らなくてもよいことについて触れている。

まず三重対角行列の場合における順序付き改良 SOR 法に対する緩和係数 ω_i の特別な選び方 n 組を示し、それらに対応した行列の順序付き UL 分解との関係を具体的に示す。

2. 三重対角行列に対する緩和係数 ω_i の選び方と行列の順序付き UL 分解

$n \times n$ 三重対角行列（[14] と [19] 参照）

$$A = [-l_i, p_i, -u_i] = \begin{pmatrix} p_1 & -u_1 & & & \\ -l_2 & p_2 & -u_2 & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -l_{n-1} & p_{n-1} & -u_{n-1} \\ \mathbf{0} & & & -l_n & p_n \end{pmatrix}, \quad \begin{array}{l} p_1, p_2, \cdots, p_n \neq 0, \\ l_{i+1}, u_i \neq 0, \\ \qquad i = 1, \cdots, n-1 \end{array}$$

を係数行列とする連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ に対し、(2) で $D = I$ とする順序付き改良 SOR 法の各反復式は次のように表される。

適当な出発値 $\boldsymbol{x}^{(0)} = [x_i^{(0)}]$, $i = 1, \cdots, n$ に対し、

$$x_i^{(m+1)} = \omega_i l_i x_{i-1}^{(m+1)} + (1 - \omega_i p_i) x_i^{(m)} + \omega_i u_i x_{i+1}^{(m)} + \omega_i b_i, \qquad m = 0, 1, 2, \cdots$$

$$\text{ただし} \qquad x_0^{(m+1)} = 0, \quad x_{n+1}^{(m)} = 0,$$

ここで、$\hat{\boldsymbol{x}} = [\hat{x}_i]$ を真の解とし、誤差ベクトル $\boldsymbol{e}^{(m)} = \boldsymbol{x}^{(m)} - \hat{\boldsymbol{x}} = [e_i^{(m)}]$, $m = 0, 1, \cdots$ とすると、$\boldsymbol{e}^{(m+1)} = \mathcal{L}_\Phi \boldsymbol{e}^{(m)}$ で表される。

定理 1 $e_1^{(m)} = \tilde{e}_1^{(m)}$, $e_i^{(m)} = \omega_i l_i \cdots \omega_2 l_2 \tilde{e}_i^{(m)}$, $i = 2, \cdots, n$ とすると、m 回反復の誤差は $\boldsymbol{e}^{(m)} = Q\tilde{\boldsymbol{e}}^{(m)}$, $\tilde{\boldsymbol{e}}^{(m+1)} = M_n \tilde{\boldsymbol{e}}^{(m)}$, $m = 0, 1, \cdots$ で表される。ここで $\tilde{\boldsymbol{e}}^{(m)} = (\tilde{e}_1^{(m)}, \cdots, \tilde{e}_n^{(m)})^t$, $Q = \mathrm{diag}(1, \omega_2 l_2, \omega_3 l_3 \omega_2 l_2, \cdots, \omega_n l_n \cdots \omega_2 l_2)$, $\mathcal{L}_\Phi = Q M_n Q^{-1}$ のとき、反復行列 $M_n = Q^{-1} \mathcal{L}_\Phi Q$ は次のように表される。

$$M_n = \begin{pmatrix} -\alpha_1 & \beta_1 & & & & & & & & \\ -\alpha_1 & \beta_1 - \alpha_2 & \beta_2 & & & & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & & \mathbf{0} & \\ -\alpha_1 & \beta_1 - \alpha_2 & \beta_2 - \alpha_3 & \cdots & \beta_{i-1} & & & & & \\ -\alpha_1 & \beta_1 - \alpha_2 & \beta_2 - \alpha_3 & \cdots & \beta_{i-1} - \alpha_i & \beta_i & & & & \\ -\alpha_1 & \beta_1 - \alpha_2 & \beta_2 - \alpha_3 & \cdots & \beta_{i-1} - \alpha_i & \beta_i - \alpha_{i+1} & \beta_{i+1} & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \beta_{n-2} & \\ -\alpha_1 & \beta_1 - \alpha_2 & \beta_2 - \alpha_3 & \cdots & \beta_{i-1} - \alpha_i & \beta_i - \alpha_{i+1} & \cdots & \cdots & \beta_{n-2} - \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ -\alpha_1 & \beta_1 - \alpha_2 & \beta_2 - \alpha_3 & \cdots & \beta_{i-1} - \alpha_i & \beta_i - \alpha_{i+1} & \cdots & \cdots & \beta_{n-2} - \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} - \alpha_n \end{pmatrix}$$

ここで、$\alpha_i = \omega_i p_i - 1$, $i = 1, \cdots, n$, $\beta_i = (\omega_{i+1} l_{i+1}) \omega_i u_i$, $i = 1, 2, \cdots, n-1$ である。

さらに $f_n(\lambda)=\det(\lambda I-\mathcal{L}_\Phi)$ に対して、

$$f_n(\lambda)=\det(\lambda I-M_n)=\begin{vmatrix} \lambda+\alpha_1 & -\beta_1 & & & \mathbf{0} \\ -\lambda & \lambda+\alpha_2 & -\beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -\lambda & \lambda+\alpha_{n-1} & -\beta_{n-1} \\ \mathbf{0} & & & -\lambda & \lambda+\alpha_n \end{vmatrix} \tag{3}$$

これから、さらに次の漸化式を得る。

$$\begin{aligned} f_0(\lambda)=1,\quad f_1(\lambda)=\lambda+\alpha_1,\quad f_n(0)=\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_n \\ f_i(\lambda)=f_{i-1}(\lambda)(\lambda+\alpha_i)-f_{i-2}(\lambda)\lambda\beta_{i-1},\qquad i=2,3,\cdots,n \end{aligned} \tag{4}$$

ここで、$\rho(\mathcal{L}_\Phi)=0$ とする条件、すなわち $f_n(\lambda)=\lambda^n$ となる条件を考えよう。
始めに $n=3$ の場合を考える。

$$\begin{aligned} f_3(\lambda) &= \det(\lambda I-M_3)=\begin{vmatrix} \lambda+\alpha_1 & -\beta_1 & 0 \\ -\lambda & \lambda+\alpha_2 & -\beta_2 \\ 0 & -\lambda & \lambda+\alpha_3 \end{vmatrix} \\ &= (\lambda+\alpha_1)(\lambda+\alpha_2)(\lambda+\alpha_3)-\lambda\{\beta_1(\lambda+\alpha_3)+\beta_2(\lambda+\alpha_1)\} \\ &= \lambda^3+\{(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)-(\beta_1+\beta_2)\}\lambda^2 \\ &\quad +\{(\alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_3+\alpha_3\alpha_1)-(\beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1)\}\lambda+\alpha_1\alpha_2\alpha_3 \end{aligned}$$

従って、 $f_3(\lambda)=\lambda^3$ を満たす必要十分条件は次の3式を満たすことである。

$$\begin{cases} \alpha_1+\alpha_2+\alpha_3=\beta_1+\beta_2 \\ \alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_3+\alpha_3\alpha_1=\beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1 \\ \alpha_1\alpha_2\alpha_3=0 \end{cases}$$

そこで、以下の4通りが得られる。
I) $\alpha_1=0,\ \alpha_2=\beta_1$ かつ $\alpha_3=\beta_2$
II) $\alpha_1=\beta_1,\ \alpha_2=\beta_2$ かつ $\alpha_3=0$
III) $\alpha_1=0,\ \alpha_2=\beta_1+\beta_2$ かつ $\alpha_3=0$
IV) $\alpha_1\alpha_3\neq 0,\ \alpha_2=0,\ \alpha_1+\alpha_3=\beta_1+\beta_2$ かつ $\alpha_3\alpha_1=\beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1$

IV) の場合、 $\beta_1=\dfrac{\alpha_1^2}{\alpha_1-\alpha_3},\quad \beta_2=\dfrac{-\alpha_3^2}{\alpha_1-\alpha_3}$

と表され、 $\dfrac{\beta_1}{\beta_2}=-\left(\dfrac{\alpha_1}{\alpha_3}\right)^2$ より $\dfrac{\omega_1 l_2 u_1}{\omega_3 l_3 u_2}=-\left(\dfrac{\omega_1 p_1-1}{\omega_3 p_3-1}\right)^2<0$ となる。

もし、$l_3u_2l_2u_1>0$ ならば、ω_1 と ω_3 の符号は異なり、ω_1 と ω_3 のどちらかが負になることになる。しかし、IV) の場合これらの関係から $\omega_i,\ i=1,2,3$ の値を具体的に決めるには難点がある（[12] 参照）。

次に $n=4$ の場合を考える。

$$
\begin{aligned}
f_4(\lambda) &= \det(\lambda I - M_4) = f_3(\lambda)(\lambda+\alpha_4) - f_2(\lambda)\lambda\beta_3 \\
&= \lambda^4 + \{(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3+\alpha_4) - (\beta_1+\beta_2+\beta_3)\}\lambda^3 + \{\alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_3+\alpha_3\alpha_1 \\
&\quad +(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\alpha_4 - (\beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1) - (\beta_1+\beta_2)\alpha_4 - \beta_3(\alpha_1+\alpha_2-\beta_1)\}\lambda^2 \\
&\quad +[\alpha_1\alpha_2\alpha_3 + \{(\alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_3+\alpha_3\alpha_1) - (\beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1)\}\alpha_4 - \alpha_1\alpha_2\beta_3]\lambda \\
&\quad +\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4
\end{aligned}
$$

同様に $f_4(\lambda) = \lambda^4$ を満たす必要十分条件は

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3+\alpha_4 = \beta_1+\beta_2+\beta_3 \\
\alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_3+\alpha_3\alpha_1+(\alpha_1+\alpha_2+\alpha_3)\alpha_4 \\
\quad = \beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1+(\beta_1+\beta_2)\alpha_4+\beta_3(\alpha_1+\alpha_2-\beta_1) \\
\alpha_1\alpha_2\alpha_3 + \{(\alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_3+\alpha_3\alpha_1) - (\beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1)\}\alpha_4 - \alpha_1\alpha_2\beta_3 = 0 \\
\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4 = 0
\end{array}
\right.
$$

を満たすことである。そこで、次の 4 通りが考えられる。

I) $\alpha_1 = 0,\ \alpha_2 = \beta_1,\ \alpha_3 = \beta_2$ かつ $\alpha_4 = \beta_3$

II) $\alpha_1 = \beta_1,\ \alpha_2 = \beta_2,\ \alpha_3 = \beta_3$ かつ $\alpha_4 = 0$

III) $\alpha_1 = 0,\ \alpha_2 = \beta_1+\beta_2,\ \alpha_3 = \beta_3$ かつ $\alpha_4 = 0$ もしくは
$\alpha_1 = 0,\ \alpha_2 = \beta_1,\ \alpha_3 = \beta_2+\beta_3$ かつ $\alpha_4 = 0$

IV)

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\alpha_1\alpha_4 \neq 0, \quad \alpha_2 = 0, \\
\alpha_1+\alpha_3+\alpha_4 = \beta_1+\beta_2+\beta_3, \\
(\alpha_1+\alpha_3)\alpha_4 - (\beta_1+\beta_2)\alpha_4 - \beta_3(\alpha_1-\beta_1) = 0 \\
\text{かつ}\ \ \alpha_1\alpha_3 - (\beta_1\alpha_3+\beta_2\alpha_1) = 0
\end{array}
\right.
$$

$$
\text{もしくは} \quad
\left\{
\begin{array}{l}
\alpha_1\alpha_4 \neq 0, \quad \alpha_3 = 0, \\
\alpha_1+\alpha_2+\alpha_4 = \beta_1+\beta_2+\beta_3, \\
\alpha_1\alpha_2+\alpha_1\alpha_4-\beta_2\alpha_1-\beta_1\alpha_4-\beta_3(\alpha_1-\beta_1) = 0 \\
\text{かつ}\ \ \alpha_2\alpha_4 - (\alpha_4\beta_2+\alpha_2\beta_3) = 0
\end{array}
\right.
$$

前と同様に IV) の場合、これらの関係から $\omega_i,\ i = 1,2,3,4$ の値を具体的に決めるには難点がある。

次に、n 次元の連立方程式に対し、$\rho(\mathcal{L}_\Phi) = 0$ とする緩和係数 $\omega_i,\ i = 1,2,\cdots,n$ の具体的な決め方 n 通りを次に示す。ここですべて分母は 0 でないとする。

Case I)

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\alpha_1 = 0 \\
\alpha_i = \beta_{i-1}, \quad i = 2,3,\cdots,n
\end{array}
\right.
\iff
\left\{
\begin{array}{l}
\omega_1 = \dfrac{1}{p_1} \\
\omega_i = \dfrac{1}{p_i - l_i\omega_{i-1}u_{i-1}}, \quad i = 2,3,\cdots,n
\end{array}
\right.
$$

このとき $A = L_n U_n$ と表される。ここに、

$$L_n = \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega_1} & & & & \text{\Large 0} \\ -l_2 & \frac{1}{\omega_2} & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & -l_{n-1} & \frac{1}{\omega_{n-1}} & \\ \text{\Large 0} & & & -l_n & \frac{1}{\omega_n} \end{pmatrix}, \quad U_n = \begin{pmatrix} 1 & -\omega_1 u_1 & & & \text{\Large 0} \\ & 1 & -\omega_2 u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -\omega_{n-1} u_{n-1} \\ \text{\Large 0} & & & & 1 \end{pmatrix}$$

いま $$P_n = \begin{bmatrix} 0 & & 1 \\ & \cdot^{\cdot^{\cdot}} & \\ 1 & & 0 \end{bmatrix}$$

に対し $\tilde{A} = P_n A P_n^T$, $\bar{U}_n = P_n L_n P_n^T$, $\bar{L}_n = P_n U_n P_n^T$, $\tilde{\Phi} = P_n \Phi P_n^T = \mathrm{diag}(\tilde{\omega}_1, \cdots, \tilde{\omega}_n)$ とおくと $\tilde{A} = \bar{U}_n \bar{L}_n$ は $\tilde{A}$ の UL 分解となり、緩和係数 $\tilde{\omega}_i$, $i = 1, 2, \cdots, n$ はピボットの逆数に対応している。

Case II)

$$\begin{cases} \alpha_n = 0 \\ \alpha_i = \beta_i, \\ \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases} \iff \begin{cases} \omega_n = \dfrac{1}{p_n} \\ \omega_i = \dfrac{1}{p_i - u_i \omega_{i+1} l_{i+1}}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{cases}$$

このとき $A = L_1 U_1$ と表される。ここに、

$$L_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega_1} & -u_1 & & & \text{\Large 0} \\ & \frac{1}{\omega_2} & -u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \frac{1}{\omega_{n-1}} & -u_{n-1} \\ \text{\Large 0} & & & & \frac{1}{\omega_n} \end{pmatrix}, \quad U_1 = \begin{pmatrix} 1 & & & & \text{\Large 0} \\ -\omega_2 l_2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & -\omega_{n-1} l_{n-1} & 1 & \\ \text{\Large 0} & & & -\omega_n l_n & 1 \end{pmatrix}$$

いま、$P_1 = I$ に対し、$\tilde{A} = P_1 A P_1^T$, $\bar{U}_1 = P_1 L_1 P_1^T$, $\bar{L}_1 = P_1 U_1 P_1^T$, $\tilde{\Phi} = P_1 \Phi P_1^T = \mathrm{diag}(\tilde{\omega}_1, \cdots, \tilde{\omega}_n)$ とおくと $\tilde{A} = \bar{U}_1 \bar{L}_1$ は $\tilde{A}$ の UL 分解となり、緩和係数 $\tilde{\omega}_i$, $i = 1, 2, \cdots, n$ はピボットの逆数に対応している。

次に点 x_k, $2 \le k \le n-1$ を変わり点とする $n \times n$ 三重対角行列 A に対応する場合を示す（[10] 参照）。

$2 \le k \le n-1$ に対して、

Case III$_k$)

$$\begin{cases} \alpha_1 = 0, \quad \alpha_i = \beta_{i-1}, \quad i = 2, \cdots, k-1 \\ \alpha_n = 0, \quad \alpha_i = \beta_i, \quad i = n-1, \cdots, k+1 \\ \alpha_k = \beta_{k-1} + \beta_k \end{cases} \iff$$

$$
\begin{cases}
\omega_1 = \dfrac{1}{p_1}, \quad \omega_i = \dfrac{1}{p_i - l_i\omega_{i-1}u_{i-1}}, \quad i = 2, \cdots, k-1 \\
\omega_n = \dfrac{1}{p_n}, \quad \omega_i = \dfrac{1}{p_i - u_i\omega_{i+1}l_{i+1}}, \quad i = n-1, \cdots, k+1 \\
\omega_k = \dfrac{1}{p_k - l_k\omega_{k-1}u_{k-1} - u_k\omega_{k+1}l_{k+1}}
\end{cases}
$$

行列 A は $A = L_kU_k$ と表される。ここに、

$$
L_k = \left(\begin{array}{cccccccccc}
\frac{1}{\omega_1} & & & & 0 & & & & & \\
-l_2 & \frac{1}{\omega_2} & & & \vdots & & & \mathbf{0} & & \\
& \ddots & \ddots & & \vdots & & & & & \\
& & -l_{k-1} & \frac{1}{\omega_{k-1}} & 0 & & & & & \\
0 & \cdots & 0 & -l_k & \frac{1}{\omega_k} & -u_k & 0 & \cdots & 0 & \\
& & & & 0 & \frac{1}{\omega_{k+1}} & -u_{k+1} & & & \\
& & & & \vdots & & \ddots & \ddots & & \\
& \mathbf{0} & & & & & & \frac{1}{\omega_{n-1}} & -u_{n-1} & \\
& & & & 0 & & & & \frac{1}{\omega_n} &
\end{array}\right),
$$

$$
U_k = \left(\begin{array}{ccccccccc}
1 & -\omega_1u_1 & & & 0 & & & & \\
& 1 & -\omega_2u_2 & & \vdots & & & \mathbf{0} & \\
& & \ddots & \ddots & 0 & & & & \\
& & & 1 & -\omega_{k-1}u_{k-1} & & & & \\
0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\
& & & & -\omega_{k+1}l_{k+1} & 1 & & & \\
& & & & 0 & \ddots & \ddots & & \\
& \mathbf{0} & & & \vdots & & -\omega_{n-1}l_{n-1} & 1 & \\
& & & & 0 & & & -\omega_nl_n & 1
\end{array}\right)
$$

いま
$$
P_k = \left[\begin{array}{c:c:c}
 & \begin{matrix} & & 1 \\ & \iddots & \\ 1 & & \end{matrix} & \\ \hdashline
1 & & \\ \hdashline
 & & \begin{matrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{matrix}
\end{array}\right]
$$

に対し、$\tilde{A} = P_kAP_k^T$, $\bar{U}_k = P_kL_kP_k^T$, $\bar{L}_k = P_kU_kP_k^T$, $\tilde{\Phi} = P_k\Phi P_k^T = \mathrm{diag}(\tilde{\omega}_1, \cdots, \tilde{\omega}_n)$ とおくと、$\tilde{A} = \bar{U}_k\bar{L}_k$ は $\tilde{A}$ の UL 分解となり、緩和係数 $\tilde{\omega}_i$, $i = 1, 2, \cdots, n$ はピボットの逆数に対応している。

Case I) と Case II) はそれぞれ Case III$_n$) と Case III$_1$) とみなせる。

n 次元の場合は他に $n = 3, 4$ の IV) の場合に対応した少なくとも $(n-2)$ 通りの選び方が考えられる。しかしこの場合、ω_i, $i = 1, 2, \cdots, n$ の値を具体的に決めるのには難点がある。

IV) の変わりとして $\rho(\mathcal{L}_\Phi) = 0$ を満たさないが、Case I), II), III$_k$) の場合と類似な関係がある次の Case IV$_k$)' の場合を示す ([12] 参照)。

$2 \le k \le n-1$ に対して、

Case IV$_k$)'

$$
\begin{cases}
\alpha_k = 0, \\
\alpha_i = \beta_i, \quad i = 1, \cdots, k-1 \\
\alpha_i = \beta_{i-1}, \quad i = k+1, \cdots, n
\end{cases}
\iff
\begin{cases}
\omega_k = \dfrac{1}{p_k}, \\
\omega_i = \dfrac{1}{p_i - u_i \omega_{i+1} l_{i+1}}, \quad i = k-1, \cdots, 1 \\
\omega_i = \dfrac{1}{p_i - l_i \omega_{i-1} u_{i-1}}, \quad i = k+1, \cdots, n
\end{cases}
$$

このとき、行列 A は $A = L'_k U'_k$ と表される。ここに、

$$
L'_k = \left(\begin{array}{ccccccccc}
\frac{1}{\omega_1} & -u_1 & & & 0 & & & & \\
 & \frac{1}{\omega_2} & -u_2 & & \vdots & & \mathbf{0} & & \\
 & & \ddots & \ddots & 0 & & & & \\
 & & & \frac{1}{\omega_{k-1}} & -u_{k-1} & r_{k+1} & r_{k+2} & \cdots & r_n \\
0 & \cdots & & 0 & \dfrac{1}{\omega_k} & 0 & \cdots & & 0 \\
q_1 & \cdots & q_{k-2} & q_{k-1} & -l_{k+1} & \frac{1}{\omega_{k+1}} & & & \\
 & & & & 0 & \ddots & \ddots & & \\
 & \mathbf{0} & & & \vdots & & -l_{n-1} & \frac{1}{\omega_{n-1}} & \\
 & & & & 0 & & & -l_n & \frac{1}{\omega_n}
\end{array} \right),
$$

$$
U'_k = \left(\begin{array}{ccccccccc}
1 & & & & 0 & & & & \\
-\omega_2 l_2 & 1 & & & \vdots & & \mathbf{0} & & \\
 & \ddots & \ddots & & \vdots & & & & \\
 & & -\omega_{k-1} l_{k-1} & 1 & 0 & & & & \\
0 & \cdots & 0 & -\omega_k l_k & 1 & -\omega_k u_k & 0 & \cdots & 0 \\
 & & & & 0 & 1 & -\omega_{k+1} u_{k+1} & & \\
 & & & & \vdots & & \ddots & \ddots & \\
 & \mathbf{0} & & & \vdots & & & 1 & -\omega_{n-1} u_{n-1} \\
 & & & & 0 & & & & 1
\end{array} \right)
$$

ただし $q_i = -l_{k+1} \prod_{j=i+1}^{k} \omega_j l_j, \quad i = 1, \cdots, k-1, \quad r_i = -u_{k-1} \prod_{j=k}^{i-1} \omega_j u_j, \quad i = k+1, \cdots, n$

いま
$$
P'_k = \left[\begin{array}{ccc|c|ccc}
1 & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & \\
 & & 1 & & & & \\
\hline
 & & & & & & 1 \\
\hline
 & & & & & & 1 \\
 & & & & & \cdot^{\cdot^{\cdot}} & \\
 & & & 1 & & &
\end{array} \right]
$$

に対し、$\tilde{A} = P'_k A P'^T_k, \bar{U}'_k = P'_k L'_k P'^T_k,\ \bar{L}'_k = P'_k U'_k P'^T_k,\ \tilde{\Phi} = P'_k \Phi P'^T_k = \mathrm{diag}(\tilde{\omega}_1, \cdots, \tilde{\omega}_n)$ とおくと、$\tilde{A} = \bar{U}'_k \bar{L}'_k$ は $\tilde{A}$ の UL 分解となり、緩和係数 $\tilde{\omega}_i,\ i = 1, 2, \cdots, n$ はピボットの逆数に対応している。

これまでの手法はブロック三重対角行列に対しても同様に適用できる。

3. 三重対角行列に対する実用的な計算法

三重対角行列を係数とする連立方程式を Gauss の消去法で解く場合に安定の条件は三重対角行列 A の成分の $\left|\frac{l_i}{p_i}+\frac{u_i}{p_i}\right|$ と 1 の差によって決まる（H.Nagasaka [14]、T.Torii [19] 及び L.Brugnano & D.Trigiante [3] 参照）。

i) $\left|\frac{l_i}{p_i}+\frac{u_i}{p_i}\right| < 1$ ならば、安定であり、精度良く計算できる。

ii) $\left|\frac{l_i}{p_i}+\frac{u_i}{p_i}\right| = 1$ ならば、$\left|\frac{l_i}{p_i}\right| \neq \left|\frac{u_i}{p_i}\right|$ のとき安定であり、また $\left|\frac{l_i}{p_i}\right| = \left|\frac{u_i}{p_i}\right| = \frac{1}{2}$ ならば準安定となる。

iii) $p_{i+1}p_i \geq 4l_{i+1}u_i,\ i=1,2,\cdots,n-1$ とする。

イ）下の **Algorithm 1.** で $\left|\frac{l_{i+1}}{p_{i+1}}\right| \leq \left|\frac{u_i}{p_i}\right|,\ i=1,2,\cdots,n-1$ ならば、計算した $x_1^{(0)}$ は精度が良いが、$|\omega_i u_i| > 1$ のとき $x_n^{(0)}$ の誤差は増大する。

ロ）下の **Algorithm 2.** で $\left|\frac{u_{i-1}}{p_{i-1}}\right| \leq \left|\frac{l_i}{p_i}\right|,\ i=2,3,\cdots,n$ ならば、計算した $x_n^{(0)}$ は精度が良いが、$|\omega_i l_i| > 1$ のとき $x_1^{(0)}$ の誤差は増大する。

iv) $p_{i+1}p_i < 4l_{i+1}u_i$ の場合、n が増大すれば、条件は ill-condition となり、精度は ill-condition に対応して悪くなる。

2 節で $\rho(\mathcal{L}_\Phi) = 0$ となる n 通りの場合を示したが、この Case I), II), III$_k$) に対する改良 SOR 法は順序に関係なく高々 n 回の反復で必ず収束することがわかっている（[12] 参照）。しかし、さらに適当な順序を考慮することにより順序付き改良 SOR 法は n 回よりもずっと少ない反復回数で収束することがある。

$\omega = \tilde{\omega}_b = \dfrac{2}{1+\sqrt{1-4lu}}$ を適用した順序付き改良 SOR 法に対する [10] における誤差評価及び数値実験はその順序に関連する重要な情報を与えてくれている。[10] の基本定理と系 1 及び 2 の結果から **Table 3.1** が得られる。ここで $n \times n$ 三重対角行列 $A = [-l, 1, -u]$ に対し、許容誤差限界 δ が与えられたときの反復回数を m とし、$e_p^{(0)} = x_p^{(0)} - \hat{x}_p$ は出発ベクトル $\boldsymbol{x}^{(0)} = [x_p^{(0)}]$ に対する第 p 成分の誤差であり、$0 \leq k_1, k_2, k \leq n$ は整数、さらに $\lambda = \tilde{\omega}_b - 1,\ |d_1| = \sqrt{\left|\dfrac{\lambda l}{u}\right|},\ |d_2| = \sqrt{\left|\dfrac{\lambda u}{l}\right|}$ である（[10] 参照）。

Remark 1　**Table 3.1** に関して、$0 < m < n$ となることがある。このとき **a), b), e)** の場合のついては、m は n に関係しない。ここで、$\left|\frac{\lambda}{d_1}\right| < \sqrt{|\lambda|} < |d_2|$ により、k_2 は k_1 より大きくなる。逆に、**c), d), f)** の場合は m は n に関係し、**d), f)** の場合は一般に $m > n$ となる。

Table 3.1 [10] に基づく m の推定

	$\|l\| > \|u\|$	$\|l\| < \|u\|$
$\|l+u\| = 1$	a) $\|\lambda\|^m \max_{1 \le p \le n} \|e_p^{(0)}\| \fallingdotseq \delta$ m は n に関係しない	d) $\|\lambda\|^{q(n+1)} \max_{1 \le p \le n} \|e_p^{(0)}\| \fallingdotseq \delta$ $m = q(n+1)$、特に $q \neq 0$ のとき m は n に関係する
$\|l+u\| < 1$	b) $\|\lambda\|^{q(n+1)} \left\|\frac{\lambda}{d_1}\right\|^{k_1} \max_{1 \le p \le n} \|e_p^{(0)}\| \fallingdotseq \delta$ $\|\lambda\| < \|\frac{\lambda}{d_1}\| < \sqrt{\|\lambda\|} < \|d_1\| < 1$ $m = q(n+1) + k_1$、特に $q = 0$ のとき m は n に関係しない	e) $\|\lambda\|^{q(n+1)} \|d_2\|^{k_2} \max_{1 \le p \le n} \|e_p^{(0)}\| \fallingdotseq \delta$ $\|\lambda\| < \sqrt{\|\lambda\|} < \|d_2\| < 1$ $m = q(n+1) + k_2$、特に $q = 0$ のとき m は n に関係しない
$\|l+u\| > 1$	c) $\|\lambda\|^{q(n+1)} \left\|\frac{\lambda}{d_1}\right\|^{k} \|d_1\|^{n+1} \max_{1 \le p \le n} \|e_p^{(0)}\| \fallingdotseq \delta$ $\|\lambda\| < 1 < \|d_1\|$ $m = q(n+1) + k$、特に $q \neq 0$ のとき m は n に関係する	f) $\|\lambda\|^{q(n+1)} \max_{1 \le p \le n} \|e_p^{(0)}\| \fallingdotseq \delta$ $\|\lambda\| < 1 < \|d_2\|$ $m = q(n+1)$、特に $q \neq 0$ のとき m は n に関係する

順序付けに関する以上のことから、次に出発ベクトルを考えよう。順序付き改良 SOR 法の出発ベクトルとして、順序付き Gauss の消去法による解を用いることにする。

通常、$\left|\frac{l_i}{p_i} + \frac{u_i}{p_i}\right| > 1$ の場合、精度の良い解は Gauss の消去法では得られにくいが、次のアルゴリズムを適用すると 1 回の反復で精度良い解が計算できる場合がある (**Example 2, 4** 及び **Remark 3.** 参照)。

具体的に前節の Case I)、II)、III$_k$) の場合に対応して成分の大小も込めた $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く手順を次に示す。

Algorithm 1. $\left|\frac{l_{i+1}}{p_{i+1}}\right| \le \left|\frac{u_i}{p_i}\right|$, $i = 1, 2, \cdots, n-1$ の場合、

1) $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ に Gauss の消去法の前進消去を $x_1, x_2, \cdots, x_n$ の順序で行う。
2) 後退代入を $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$ の順序で行う。
3) 計算解を $\boldsymbol{x}^{(0)}$ と置き、$x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$ の順序で 1) で得られたピボットの逆数を緩和係数 ω_i, $i = 1, 2, \cdots, n$ とする順序付き改良 SOR 法で反復させる。

Algorithm 2. $\left|\frac{l_i}{p_i}\right| \ge \left|\frac{u_{i-1}}{p_{i-1}}\right|$, $i = 2, 3, \cdots, n$ の場合

1) $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ に Gauss の消去法の前進消去を $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1$ の順序で行う。
2) 後退代入を $x_1, x_2, \cdots, x_n$ の順序で行う。
3) 計算解を $\boldsymbol{x}^{(0)}$ と置き、$x_1, x_2, \cdots, x_n$ の順序で 1) で得られたピボットの逆数を緩和係数 ω_i, $i = 1, 2, \cdots, n$ とする順序付き改良 SOR 法で反復させる。

Algorithm 3. $2 \le k \le n-1$ となるある k に対し、安定変わり点 x_k を持つ場合 ([10] 参照) 、行列 A を変わり点を境として $\left|\frac{l_{i+1}}{p_{i+1}}\right| \le \left|\frac{u_i}{p_i}\right|$, $i = 1, \cdots, k-1$ となる各 x_i を A_1 ブロック、$\left|\frac{l_i}{p_i}\right| \ge \left|\frac{u_{i-1}}{p_{i-1}}\right|$, $i = k+1, \cdots, n$ となる各 x_i を A_2 ブロックとする。

1) $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ に Gauss の消去法の前進消去を A_1 ブロックは $x_1, x_2, \cdots, x_{k-1}$、$A_2$ ブロックは $x_n, x_{n-1}, \cdots, x_{k+1}$、最後に x_k の順序で行う。
2) 後退代入を A_1 ブロックは $x_{k-1}, x_{k-2}, \cdots, x_1$、$A_2$ ブロックは $x_{k+1}, x_{k+2}, \cdots, x_n$ の順序で行う。
3) 計算解を $\boldsymbol{x}^{(0)}$ と置き、まず x_k を続いて A_1 ブロックは $x_{k-1}, x_{k-2}, \cdots, x_1$、$A_2$ ブロックは $x_{k+1}, x_{k+2}, \cdots, x_n$ の順序で、1) で得られたピボットの逆数を緩和係数 ω_i, $i=1,2,\cdots,n$ とする順序付き改良 SOR 法で反復させる。

さらに、これらを応用して一般の $n\times n$ 三重対角行列 $A=[-l_i, p_i, -u_i]$ に対するアルゴリズムを次に示すことにする。

連立方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{b}=[b_i]$ において $i_0=0$, $i_{m+1}=n+1$ とし、$i=i_{k-1}+1, i_{k-1}+2, \cdots, i_k-1$ に対し、イ) $\left|\frac{l_{i+1}}{p_{i+1}}\right|\le\left|\frac{u_i}{p_i}\right|$、ロ) $\left|\frac{l_i}{p_i}\right|\ge\left|\frac{u_{i-1}}{p_{i-1}}\right|$、ハ) 安定変わり点 x_{j_k}, $(i_{k-1}+1<j_k<i_k-1)$ を 1 つ持つ、つまり、$\left|\frac{l_{i+1}}{p_{i+1}}\right|\le\left|\frac{u_i}{p_i}\right|$, $i=i_{k-1}+1, i_{k-1}+2, \cdots, j_k-2$ かつ $\left|\frac{l_i}{p_i}\right|\ge\left|\frac{u_{i-1}}{p_{i-1}}\right|$, $i=j_k+2, j_k+3, \cdots, i_k-1$ のいずれかを満足するように点 x_{i_k}, $k=1,2,\cdots,m$ (ただし $1<i_1<i_2<\cdots<i_m<n$) を適当に選ぶ ([10] の不安定な変わり点はすべてこの $\{x_{i_k}\}_{k=1}^m$ の中に含まれる)。$k=1,2,\cdots,m+1$ に対し、点 $x_{i_{k-1}}$ と x_{i_k} との間の $x_{i_{k-1}+1}, \cdots, x_{i_k-1}$ を 1 つのブロックとするとブロック内の点 x_i における値を次のように表す。

$$x_i=\bar{x}_i x_{i_{k-1}}+\bar{y}_i x_{i_k}+\bar{z}_i, \qquad i=i_{k-1}+1, \cdots, i_k-1 \tag{5}$$

この係数 $\bar{x}_i$, $\bar{y}_i$, $\bar{z}_i$ は次の連立方程式を解くことで計算できる。

$$\begin{array}{lll} -l_i\bar{x}_{i-1}+p_i\bar{x}_i-u_i\bar{x}_{i+1}=0, & i=i_{k-1}+1, \cdots, i_k-1, & \bar{x}_{i_{k-1}}=1, \quad \bar{x}_{i_k}=0 \\ -l_i\bar{y}_{i-1}+p_i\bar{y}_i-u_i\bar{y}_{i+1}=0, & i=i_{k-1}+1, \cdots, i_k-1, & \bar{y}_{i_{k-1}}=0, \quad \bar{y}_{i_k}=1 \\ -l_i\bar{z}_{i-1}+p_i\bar{z}_i-u_i\bar{z}_{i+1}=b_i, & i=i_{k-1}+1, \cdots, i_k-1, & \bar{z}_{i_{k-1}}=\bar{z}_{i_k}=0 \end{array} \tag{6}$$

点 x_{i_k} における値に対する三項方程式は

$$-l_{i_k}x_{i_k-1}+p_{i_k}x_{i_k}-u_{i_k}x_{i_k+1}=b_{i_k} \tag{7}$$

であるので、(5) を (7) に代入して点 x_{i_k}, $k=1,2,\cdots,m$ における値以外を消去した方程式は次のように表される。

$$-r_{i_k}x_{i_{k-1}}+s_{i_k}x_{i_k}-t_{i_k}x_{i_{k+1}}=f_{i_k}, \quad k=1,\cdots,m, \quad x_{i_0}=0, \quad x_{i_{m+1}}=0 \tag{8}$$

$$\text{ここで} \quad \begin{cases} r_{i_k}=l_{i_k}\bar{x}_{i_k-1}, \\ s_{i_k}=p_{i_k}-l_{i_k}\bar{y}_{i_k-1}-u_{i_k}\bar{x}_{i_k+1}, \\ t_{i_k}=u_{i_k}\bar{y}_{i_k+1}, \\ f_{i_k}=l_{i_k}\bar{z}_{i_k-1}+u_{i_k}\bar{z}_{i_k+1}+b_{i_k} \end{cases} \tag{9}$$

Algorithm 4.

1) $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ に対して、各ブロックごとに (6) の方程式の解を前述の条件に応じて

イ) $\left|\frac{l_{i+1}}{p_{i+1}}\right|\le\left|\frac{u_i}{p_i}\right|$ ならば **Algorithm 1.**、

ロ) $\left|\frac{l_i}{p_i}\right| \geq \left|\frac{u_{i-1}}{p_{i-1}}\right|$ ならば **Algorithm 2.**、

ハ) 安定変わり点を1つ内部に持つならば **Algorithm 3.**

をそれぞれ適用して計算する。
2) (9) で得られる係数を持つ連立方程式 (8) を解き、すべての点 x_{i_k} における値を計算する。
3) 最後に 2) で得られた点 $x_{i_k},\ k=1,2,\cdots,m$ における値を (5) に代入してすべてのブロック内の点 x_i における値を計算する。

これらのアルゴリズムに従って解くと $\left|\frac{l_i}{p_i}+\frac{u_i}{p_i}\right| > 1$ であっても1回の反復で精度良い解が計算できる場合がある。ただし、**Algorithm 4.** ではブロックの大きさが大き過ぎて計算の精度が上がらない場合がある。その場合にはブロックを更に小さく分割して同様な手法を適用することで精度良い計算が可能となる。

4. 数値実験例

以上の緩和係数、順序及び出発ベクトル $\boldsymbol{x}^{(0)}$ の取り方に対しての数値実験例をここで示す。取り扱う連立方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ の真の解は簡単のため $\hat{\boldsymbol{x}}=[\hat{x}_i],\ \hat{x}_i=1,\ i=1,\cdots,n$ とする。許容誤差限界 $\delta=10^{-8}$ に対して $\max_{1\leq i\leq n}|e_i^{(m)}|<\delta$ となる最小の反復回数 m をそれぞれの方法に対し比較のために計算した。

Example 1. $4lu<1$ であるが、$|l+u|>1$ のため直接法では誤差が増大する $n\times n$ 三重対角行列 $A=\left[-\frac{4}{3},1,-\frac{1}{6}\right]$ (ここで $4lu=\frac{8}{9}$, $|l+u|=1.5$) に対して、まず出発ベクトルを $\boldsymbol{x}^{(0)}=[x_i^{(0)}],\ x_i=0,\ i=1,\cdots,n$ とし、緩和係数を $\tilde{\omega}_b=\dfrac{2}{1+\sqrt{1-4lu}}$ ([10] 参照) 及び Case I)、II) の $\omega_i,\ i=1,\cdots,n$ とする順序付き改良 SOR 法を行った。

$m_{\tilde{\omega}_b}, m_I, m_{II}$ はそれぞれ $\tilde{\omega}_b$ 及び Case I)、II) での $\omega=\omega_i,\ i=1,\cdots,n$ 及び我々の提案する順序を適用させたときの反復回数を表している。また、$m_{\tilde{\omega}_b-inv}, m_{I-inv}, m_{II-inv}$ はそれぞれ $\tilde{\omega}_b$ 及び Case I)、II) の ω_i を用いて、我々の提案する順序の逆順に解いたときの反復回数である。

Table 4.1 において緩和係数が $\tilde{\omega}_b$ の場合の反復回数は行列の次数 n よりわずかに大きいが、順序が適当で緩和係数が Case I) 及び Case II) の場合は n 回以内で収束している。反復回数が最も少ないのは Case II) の場合である ([11] の数値実験例も参照せよ)。

$|l+u|>1$ より、行列の次数 n が大きくなると丸めの誤差が増大し、また緩和係数 ω_i は $\tilde{\omega}_b$ に近付く点に注意せよ。それゆえに、反復回数 m_{I-inv} と m_{II-inv} は理論上は n であるが誤差のために m_I と m_{II} の場合よりそれぞれ約 n 回分だけ増加していることに気づく。このような現象は緩和係数 ω_i が $\tilde{\omega}_b$ の場合と考えると理解できる。

Table 4.1 $|l+u|>1,\quad l>u>0$ の適用例

n	$m_{\tilde{\omega}_b}$	$m_{\tilde{\omega}_b-inv}$	m_I	m_{I-inv}	m_{II}	m_{II-inv}
10	30	33	10	10	10	10
20	35	42	14	20	20	20
30	45	62	14	34	27	32
40	55	82	33	80	27	51
50	65	102	38	100	27	71
100	123	216	88	216	51	149
200	212	392	188	405	123	322
300	321	610	295	615	200	497
400	414	799	388	803	278	678
500	526	1020	499	1022	374	869
600	622	1214	595	1216	460	1058
700	720	1407	692	1409	549	1245
800	816	1602	788	1603	636	1434

次に出発ベクトル $\boldsymbol{x}^{(0)}$ を Gauss の消去法で計算する場合を考える。

Example 2. $n=50$ の $n\times n$ 三重対角行列 $A=\left[-\frac{1}{6},1,-\frac{4}{3}\right]$ に対して **Algorithm 1.** を適用する。

Table 4.2 Algorithm 1. を適用した例

i	$x_i^{(0)} - \hat{x}_i$		$x_i^{(1)} - \hat{x}_i$	
1	1.24999997395819 $\cdots$	E-01	-2.047 $\cdots$	E-12
2	9.3749998046864 $\cdots$	E-02	-2.047 $\cdots$	E-12
3	5.4687498860670 $\cdots$	E-02	-1.194 $\cdots$	E-12
4	2.9296874389645 $\cdots$	E-02	-6.39 $\cdots$	E-13
5	1.5136718434650 $\cdots$	E-02	-3.30 $\cdots$	E-13
6	7.690429527281 $\cdots$	E-03	-1.68 $\cdots$	E-13
7	3.875732341130 $\cdots$	E-03	-8.4 $\cdots$	E-14
8	1.945495564937 $\cdots$	E-03	-4.2 $\cdots$	E-14
9	9.74655131061 $\cdots$	E-04	-2.1 $\cdots$	E-14
10	4.87804402679 $\cdots$	E-04	-1.0 $\cdots$	E-14
11	2.44021410626 $\cdots$	E-04	-5. $\cdots$	E-15
12	1.22040507634 $\cdots$	E-04	-2. $\cdots$	E-15
13	6.1027704397 $\cdots$	E-05	-1. $\cdots$	E-15
14	3.0515714844 $\cdots$	E-05	-0. $\cdots$	E-15
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	

ここに、$x_i^{(0)}-\hat{x}_i$ が Gauss の消去法による第 i 成分の計算解の誤差であり、$x_i^{(1)}-\hat{x}_i$ が順序付き改良 SOR 法を 1 回行った場合の第 i 成分の誤差であり、誤差の縮小が著しい（**Remark 3.** を見よ）。

Example 3. $n=50$ の $n\times n$ 三重対角行列 $A=\left[-\frac{4}{3},1,-\frac{1}{6}\right]$ に対して **Algorithm 2.** の Gauss の消去法の順序を反対にした場合を考える。

Table 4.3 $|l+u|>1$ の適用例

i	$x_i^{(0)}-\hat{x}_i$	$x_i^{(1)}-\hat{x}_i$	$x_i^{(2)}-\hat{x}_i$	$x_i^{(3)}-\hat{x}_i$	$x_i^{(4)}-\hat{x}_i$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
35	1.90638···E-06	-2.9031 ··· E-11	-2.9033 ··· E-11	-2.9033 ··· E-11	-2.9033 ··· E-11
36	3.81271···E-06	-1.16242···E-10	-1.16246···E-10	-1.16246···E-10	-1.16246···E-10
37	7.62520···E-06	-4.65202···E-10	-4.65210···E-10	-4.65210···E-10	-4.65210···E-10
38	1.52494···E-05	-1.86127···E-09	-1.86128···E-09	-1.86128···E-09	-1.86128···E-09
39	3.04952···E-05	-7.44601···E-09	-7.44604···E-09	-7.44604···E-09	-7.44604···E-09
40	6.09755···E-05	-2.97859···E-08	-2.97859···E-08	-2.97859···E-08	-2.97859···E-08
41	1.21891···E-04	-1.19147···E-07	-1.19147···E-07	-1.19147···E-07	-1.19147···E-07
42	2.43544···E-04	-4.76596···E-07	-4.76597···E-07	-4.76597···E-07	-4.76597···E-07
43	4.86136···E-04	-1.90640···E-06	-1.90640···E-06	-1.90640···E-06	-1.90640···E-06
44	9.68459···E-04	-7.62563···E-06	-7.62563···E-06	-7.62563···E-06	-7.62563···E-06
45	1.92166···E-03	-3.05026···E-05	-3.05026···E-05	-3.05026···E-05	-3.05026···E-05
46	3.78233···E-03	-1.22010···E-04	-1.22010···E-04	-1.22010···E-04	-1.22010···E-04
47	7.32064···E-03	-4.88042···E-04	-4.88042···E-04	-4.88042···E-04	-4.88042···E-04
48	1.36651···E-02	-1.95217···E-03	-1.95217···E-03	-1.95217···E-03	<u>3.99140···E-10</u>
49	2.34260···E-02	-7.80868···E-03	-7.80868···E-03	<u>6.80017···E-10</u>	<u>6.87407···E-10</u>
50	3.12347···E-02	-3.12347···E-02	<u>8.86984···E-10</u>	<u>9.16543···E-10</u>	<u>9.16543···E-10</u>

ここで、$x_i^{(0)}-\hat{x}_i$ が Gauss の消去法による第 i 成分の計算解の誤差であり、$x_i^{(j)}-\hat{x}_i$, $j=1,2,3,4$ が順序付き改良SOR法をそれぞれj回行った場合の第 i 成分の誤差である。

この問題は出発ベクトル $\boldsymbol{x}^{(0)}$ を UL 分解と逆の LU 分解で計算し、改良SOR法の順序は正しくとった例であり、1回目の反復では **Example 2.** と比較して誤差の縮小が少ない。誤差 $x_{50}^{(1)}-\hat{x}_{50}$ が0になっていないのは丸めの誤差のためである。しかしながら、2回目の反復で第n成分の誤差が縮小したのに対しその後第j反復ごとに第$n-j+2$成分までほぼ同じ誤差の縮小が起こっているのがわかる（[11] 参照）。

Example 4. $n=81$ で $k=41$ のとき、安定変わり点 x_k を持つ $n\times n$ 三重対角行列 $A=[-l_i,1,-u_i]$ に対して **Algorithm 3.** を適用する。

ここに、

$$\begin{cases} l_{i+1}=-\dfrac{1}{6}, & u_i=-\dfrac{4}{3}, \qquad i=1,2,\cdots,k-1 \\ l_i=-\dfrac{4}{3}, & u_{i-1}=-\dfrac{1}{6}, \qquad i=k+1,k+2,\cdots,n \end{cases}$$

$x_i^{(0)}-\hat{x}_i$ が **Algorithm 3.** 1) の順序付き Gauss の消去法による第 i 成分の計算解 $x_i^{(0)}$ の誤差であり、$x_i^{(1)}-\hat{x}_i$ が $\boldsymbol{x}^{(0)}=[x_i^{(0)}]$ に対して順序付き改良SOR法を1回反復した場合の第 i 成分 $x_i^{(1)}$ の誤差であり、誤差の縮小が著しい（**Remark 3.** を見よ）。

Table 4.4　Algorithm 3. を適用した例

i	$x_i^{(0)} - \hat{x}_i$		$x_i^{(1)} - \hat{x}_i$	
1	3.906251628990 $\cdots$	E-03	1.13976 $\cdots$	E-10
2	2.929688721742 $\cdots$	E-03	2.59486 $\cdots$	E-10
3	1.708985087683 $\cdots$	E-03	1.84961 $\cdots$	E-10
4	9.15527725544 $\cdots$	E-04	1.06688 $\cdots$	E-10
5	4.73022658197 $\cdots$	E-04	4.1865 $\cdots$	E-11
6	2.40326027955 $\cdots$	E-04	1.7984 $\cdots$	E-11
7	1.21116688691 $\cdots$	E-04	8.236 $\cdots$	E-12
8	6.0796763024 $\cdots$	E-05	3.921 $\cdots$	E-12
9	3.0457986181 $\cdots$	E-05	1.908 $\cdots$	E-12
10	1.5243894258 $\cdots$	E-05	9.39 $\cdots$	E-13
11	7.625672420 $\cdots$	E-06	4.65 $\cdots$	E-13
12	3.813767533 $\cdots$	E-06	2.30 $\cdots$	E-13
13	1.907116597 $\cdots$	E-06	1.14 $\cdots$	E-13
14	9.53616506 $\cdots$	E-07	5.7 $\cdots$	E-14
15	4.76822805 $\cdots$	E-07	2.8 $\cdots$	E-14
16	2.38415040 $\cdots$	E-07	1.4 $\cdots$	E-14
17	1.19208429 $\cdots$	E-07	7. $\cdots$	E-15
18	5.9604442 $\cdots$	E-08	3. $\cdots$	E-15
19	2.9802277 $\cdots$	E-08	1. $\cdots$	E-15
20	1.4901153 $\cdots$	E-08	0. $\cdots$	E-15
$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	

Remark 2　(6) 式の解 $\bar{x}_i,\ \bar{y}_i,\ \bar{z}_i$ について $|l_i| + |u_i| \le |p_i|$ ならば、最大値原理から有界性が保証されるが、$|l_i| + |u_i| > |p_i|$ のときは有界性が保証されない。したがって、(8) 式の $r_{i_k}, s_{i_k}, t_{i_k}$ は $|l_i| + |u_i| > |p_i|$ のとき増大する場合があり、その分精度が悪くなる。

このことを示す例題を次にあげる。

Example 5.　不安定変わり点 x_k を持つ $n \times n$ 三重対角行列 $A = [-l_i, 1, -u_i]$ に対して **Algorithm 4.** を適用する。$|l_i| + |u_i| > |p_i|$ の例として

$$\begin{cases} l_{i+1} = -\dfrac{4}{3}, & u_i = -\dfrac{1}{6}, \qquad i = 1, 2, \cdots, k-1 \\ l_i = -\dfrac{1}{6}, & u_{i-1} = -\dfrac{4}{3}, \qquad i = k+1, k+2, \cdots, n \end{cases}$$

に対して $n = 41,\ k = 21$ のとき $i_1 = 1,\ i_2 = 21,\ i_3 = 41$ にとると、

$$r_k = 349525.666666983\cdots, \quad s_k = 3.33333969116817\cdots\mathrm{E}-01,$$
$$t_k = 349525.666666983\cdots,$$

となり $r_k,\ t_k$ が増大した分 x_k の誤差は $e_{21} = 1.280112\cdots\mathrm{E}-09$ と大きくなる。

これに対して、$|l_i| + |u_i| \le |p_i|$ の例として

$$\begin{cases} l_{i+1} = -0.9, & u_i = -0.1, \qquad i = 1, 2, \cdots, k-1 \\ l_i = -0.1, & u_{i-1} = -0.9, \qquad i = k+1, k+2, \cdots, n \end{cases}$$

で $n=81,\ k=41$ のとき $i_1=1,\ i_2=41,\ i_3=81$ にとると、

$$r_k = 8.000000000000003\mathrm{E}-01, \quad s_k = 8.000000000000000\mathrm{E}-01,$$
$$t_k = 8.000000000000003\mathrm{E}-01,$$

となり $r_k,\ t_k$ が増大しないので、 x_k の誤差は $|e_{41}| \leq 10^{-15}$ と精度が良い。

5. 順序付き改良反復法

前節まで三重対角行列の場合の直接法と順序付き改良SOR法との関連性及び具体的な数値計算法を示したが、ここではHessenberg行列の場合を含むより一般の行列への応用を考え、これを一般化した反復解法を提案する。

正則な $n \times n$ 行列 A に対し連立方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を考える。適当な置換行列 P をとり $\tilde{A} = PAP^T$ とおき、それぞれ正則な上三角行列 $\bar{U}$ と対角成分がすべて1となる下三角行列 $\bar{L}$ により $\tilde{A} = \bar{U} \cdot \bar{L}$ と表すとき、これを $\tilde{A}$ の UL 分解（または A の P による順序付き UL 分解）と呼ぶことにする。このとき次のように表わされる反復法を“順序付き改良反復法”と呼ぶ。

$$\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m+1)} = \tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} - \bar{L}^{-1}\tilde{\Phi}(\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} - \tilde{\boldsymbol{b}}) = H_{\tilde{\Phi}}\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} + \bar{L}^{-1}\tilde{\Phi}\tilde{\boldsymbol{b}} \tag{10}$$

ここで $\tilde{\boldsymbol{b}} = P\boldsymbol{b},\ \tilde{\Phi} = \mathrm{diag}(\tilde{\omega}_1, \cdots, \tilde{\omega}_n)$ は $\bar{U}$ の対角成分からなる対角行列の逆行列であり、$H_{\tilde{\Phi}} = \bar{L}^{-1}(I - \tilde{\Phi}\bar{U})\bar{L}$ を順序付き改良反復行列と呼ぶ。

Remark 3 *Gauss* の消去法による計算解 $\tilde{\boldsymbol{x}}^{(0)}$ の精度を改良する反復改良法（[17] 参照）はこの場合、

$$\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m+1)} = \tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} - \bar{L}^{-1}\bar{U}^{-1}(\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{x}}^{(m)} - \tilde{\boldsymbol{b}}) \tag{11}$$

となる。$\bar{U}\tilde{\boldsymbol{y}} = \tilde{\boldsymbol{b}}$ となる $\tilde{\boldsymbol{y}}$ は誤差が順次縮小するという高精度での計算ができる場合は、$\bar{L}\tilde{\boldsymbol{x}}^{(0)} = \tilde{\boldsymbol{y}}$ となる $\tilde{\boldsymbol{x}}^{(0)}$ を求める際に計算誤差が拡大する場合であっても反復改良法と同様に順序付き改良反復法も有効になる。その理由は、$\tilde{\boldsymbol{e}}^{(0)} = \tilde{\boldsymbol{x}}^{(0)} - \hat{\boldsymbol{x}}$（ただし $\hat{\boldsymbol{x}}$ は $\tilde{A}\tilde{\boldsymbol{x}} = \tilde{\boldsymbol{b}}$ の解）に対し、$(I - \tilde{\Phi}\bar{U})\bar{L}\tilde{\boldsymbol{e}}^{(0)}$ が非常に高精度になるためである。（**Example 2.** と **4.** を参照）

定理 2 順序付き改良反復行列 $H_{\tilde{\Phi}}$ のスペクトル半径は $\rho(H_{\tilde{\Phi}}) = 0$ となる。従って任意の出発ベクトルに対して順序付き改良反復法は高々 n 回の反復で収束する。

Proof. $H_{\tilde{\Phi}} = \bar{L}^{-1}(I - \tilde{\Phi}\bar{U})\bar{L}$ かつ $I - \tilde{\Phi}\bar{U}$ は対角成分がすべて0の上三角行列となる。従って $\rho(H_{\tilde{\Phi}}) = 0$ となる。 □

Remark 4 (11) の反復改良法は1回の反復で収束する。

補題 1 正則な $n \times n$ 行列 $\tilde{A}$ に対し、$\tilde{A} = I - \tilde{L} - \tilde{U}$ とする。ここに、$\tilde{U}$ は上三角行列、$\tilde{L}$ は狭義下三角行列とする。$\tilde{A} = \bar{U}\bar{L}$ と UL 分解するとき $\bar{L} = I - \tilde{\Phi}\tilde{L}$ であるための必要かつ十分条件は $\bar{L} = [\bar{l}_{i,j}],\ \bar{U} = [\bar{u}_{i,j}]$ とするとき、$\displaystyle\sum_{p=i+1}^{n} \bar{u}_{i,p}\bar{l}_{p,k} = 0,\ i > k \geq 1$ のときである。ただし、$\tilde{\Phi}^{-1} = \mathrm{diag}(\frac{1}{\tilde{\omega}_1}, \cdots, \frac{1}{\tilde{\omega}_n})$ は $\bar{U}$ の対角成分よりなる対角行列である。特に、行列 $\tilde{A}$ が正則な上半 *Hessenberg* 行列であるとき、$\bar{L} = I - \tilde{\Phi}\tilde{L}$ となる。

Proof. $\tilde{A}=[\tilde{a}_{i,j}],\ \bar{L}=[\bar{l}_{i,j}],\ \bar{U}=[\bar{u}_{i,j}]$ とおくとき、

$$\bar{u}_{kk}\bar{l}_{kk}=\tilde{a}_{kk}-\sum_{p=k+1}^{n}\bar{u}_{kp}\bar{l}_{pk},\qquad 1\le k\le n$$

$$\begin{cases}\bar{u}_{k,j}=\dfrac{1}{\bar{l}_{j,j}}(\tilde{a}_{k,j}-\displaystyle\sum_{p=j+1}^{n}\bar{u}_{k,p}\bar{l}_{p,j}), & j>k\ge 1\\ \bar{l}_{i,k}=\dfrac{1}{\bar{u}_{i,i}}(\tilde{a}_{i,k}-\displaystyle\sum_{p=i+1}^{n}\bar{u}_{i,p}\bar{l}_{p,k}), & i>k\ge 1\end{cases}$$

と表される（[9] 参照）。これより補題が導ける。 □

定理 3 連立方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ に対し、適当な置換行列 P をとり、$\tilde{A}=PAP^T=I-\tilde{L}-\tilde{U}$ とする。ここに、$\tilde{U}$ は上三角行列、$\tilde{L}$ は狭義下三角行列とする。行列 $\tilde{A}=\bar{U}\bar{L}$ と UL 分解し、$\bar{U}$ の対角成分からなる対角行列の逆行列を $\tilde{\Phi}$ とするとき、$H_{\tilde{\Phi}}=(I-\tilde{\Phi}\tilde{L})^{-1}\{(I-\tilde{\Phi})+\tilde{\Phi}\tilde{U}\}$、つまり順序付き改良反復法と順序付き改良 SOR 法が同じになるための必要かつ十分条件は $\bar{L}=I-\tilde{\Phi}\tilde{L}$ のときである。

Proof. 上の補題により $\tilde{A}=I-\tilde{L}-\tilde{U}$ とするとき、$\bar{L}=I-\tilde{\Phi}\tilde{L}$ でありかつその時に限り、順序付き改良反復行列 $H_{\tilde{\Phi}}$ は

$$H_{\tilde{\Phi}}=\bar{L}^{-1}(I-\tilde{\Phi}\bar{U})\bar{L}=\bar{L}^{-1}(\bar{L}-\tilde{\Phi}\tilde{A})=(I-\tilde{\Phi}\tilde{L})^{-1}\{(I-\tilde{\Phi})+\tilde{\Phi}\tilde{U}\}\equiv\tilde{\mathcal{L}}_{\tilde{\Phi}}$$

となる。 □

Remark 5 行列 $\tilde{A}$ が上半 *Hessenberg* 行列のとき、$H_{\tilde{\Phi}}=\tilde{\mathcal{L}}_{\tilde{\Phi}}$ よりこの 2 つの反復解法は同じになる。

定理 2 と定理 3 により $\rho(\tilde{\mathcal{L}}_{\tilde{\Phi}})=0$ とする緩和係数 $\tilde{\omega}_i$ の決め方を与える次の定理は Hessenberg 行列の場合を含み、三重対角行列の場合の拡張となっている。

定理 4 $n\times n$ 行列 A に対し、適当な置換行列 P をとり $\tilde{A}=PAP^T=\bar{U}\bar{L}$ と UL 分解し、$\bar{U}=[\bar{u}_{i,j}],\ \bar{L}=[\bar{l}_{i,j}]$ とするとき、$\displaystyle\sum_{p=i+1}^{n}\bar{u}_{i,p}\bar{l}_{p,k}=0,\ i>k\ge 1$ となるとき定理 3 の $\tilde{\Phi}$ に対し $\rho(\tilde{\mathcal{L}}_{\tilde{\Phi}})=0$ となる。

今までは簡単のため (2) で $D=I$ としたが、一般の場合の順序付き改良 SOR 法に対しては次の定理が同様に得られる。

定理 5 連立方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ に対し、適当な置換行列 P をとり $\tilde{A}=PAP^T=\tilde{D}-\tilde{L}-\tilde{U}$ とする。ここに $\tilde{D}$ は対角行列、$\tilde{U}$ は上三角行列、$\tilde{L}$ は狭義下三角行列とする。 行列 $\tilde{A}=\bar{U}\bar{L}$ と UL 分解し $\bar{U}\tilde{D}^{-1}$ の対角成分からなる対角行列の逆行列を $\tilde{\Phi}$ とするとき、$H_{\tilde{\Phi}}=(\tilde{D}-\tilde{\Phi}\tilde{L})^{-1}\{(I-\tilde{\Phi})\tilde{D}+\tilde{\Phi}\tilde{U}\}$ となるための必要かつ十分条件は $\bar{L}=\tilde{D}-\tilde{\Phi}\tilde{L}$ である。このとき $\rho(\tilde{\mathcal{L}}_{\tilde{\Phi}})=0$ となる。

これまでの手法はブロック三重対角行列に対しても同様に適用できる。

参考文献

[1] A. E. Berger, H. Han, and R. B. Kellogg, *A priori estimates and analysis of a numerical method for a turning point problem*, Math. Comp. **42**, (1984) 465-492.

[2] P. H. Brazier, *An optimum SOR procedure for the solution of elliptic partial differential equations with any domain or coefficient set*, Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg. **3**, (1974) 335-347.

[3] L. Brugnano and D. Trigiante, Tridiagonal matrices : invertibility and conditioning, *Linear Algebra and Its Applications* **166** (1992), 131-150.

[4] J. J. Buoni and R. S. Varga, *Theorems of Stein-Rosenberg type*, in Numerical Mathematics (R.Ansorge, K.Glashoff, and B.Werner,eds) Birkhauser, Basel, (1979) 65-75.

[5] L. W. Ehrlich, *An Ad-Hoc SOR method*, J. Comput. Phys. **44**, (1981) 31-45.

[6] H. C. Elman and M. P. Chernesky, *Ordering effects on relaxation methods applied to the discrete convection-diffusion*, in Recent Advances in Iterative Methods, ed. G.Golub, A.Greenbaum and M.Luskin, (1994) 45-57.

[7] D. J. Evans and M. M. Martins, *On the convergence of the extrapolated AOR method*, Intern. J. Computer Math. **43**, (1992) 161-171.

[8] H. Han, V. P. Il'in, W. Yuan and R. B. Kellogg, *Analysis of flow directed iterations*, J. Comput. Math. **10**, (1992) 57-76.

[9] E. Isaacson and H. B. Keller, *Analysis of numerical method*, (John Wiley & Sons, Inc., New York, 1966).

[10] E. Ishiwata and Y. Muroya, *Improved SOR-like method with orderings for non-symmetric linear equations derived from singular perturbation problems*, Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations and its Applications, World Scientific Publishers, to appear.

[11] E. Ishiwata and Y. Muroya, *Error estimates of the improved SOR method with orderings for the tridiagonal matrices*, Tech. Report 95-15, Advanced Research Center for Science and Engineering, Waseda University (1995).

[12] E. Ishiwata and Y. Muroya, *The convergence theorems for the improved SOR method with orderings*, Tech. Report 95-16, Advanced Research Center for Science and Engineering, Waseda University (1995).

[13] K. R. James, *Convergence of matrix iterations subject to diagonal dominance*, SIAM J. Numer. Anal. **10**, (1973) 478-484.

[14] H. Nagasaka, *Error propagation in the solution of tridiagonal linear equations*, Information Processing in Japan **5**, (1965) 38-44.

[15] E. O'Riordan, and M. Stynes, *A finite element method for a singularly perturbed boundary value problem*, Numer. Math. **50**, (1986) 1-15.

[16] D. B. Russel, *On obtaining solutions to the Navier-Stokes equations with automatic digital computers*, Ministry of Aviation, Aeronautical Research Council, Reports and Memoranda no.3331, (1963).

[17] R. D. Skeel, *Iterative refinement implies numerical stability for Gaussian Elimination*, Math. Comp. **35**, (1980) 817-832.

[18] J. C. Strikwerda, *Iterative methods for the numerical solution of second order elliptic equations with large first order terms*, SIAM. J. Sci. Statist. Comput. **1**, (1980) 119-130.

[19] T. Torii, *Inversion of tridiagonal matrices and the stability of tridiagonal systems of linear equation*, Information Processing in Japan **6**, (1966) 41-46.